

研究課題別中間評価結果

1. 研究課題名： 計算科学によるグラファイト系材料の基礎物性解明とそのデバイス応用における設計

2. 研究代表者： 岡田 晋（筑波大学数理物質系 准教授）

3. 研究概要

本研究では、理想的なグラファイト系物質の物性と現実とのギャップである「サイエンスとテクノロジーの乖離」を量子論に立脚した計算科学のアプローチを以て解消し、グラファイト系デバイスの設計指針を提示する。

具体的には、以下のテーマを推進する。

- (1) グラファイト系物質の基礎物性解明
- (2) グラファイト広義複合構造の基礎物性探索
- (3) グラファイト系物質を用いたデバイス構造の探索・提案

4. 中間評価結果

4-1. 研究の進捗状況及び研究成果の現状

グラファイトと異種物質の複合構造体における界面近傍のバンド構造の解明に関しては順調に進捗し、原著論文、国際学会への発表件数も多く、プレス発表も行っている点は評価できる。集積化デバイスへの応用という観点からは、MOS 構造における界面を中心に現在までに得られた結果は、グラファイト利用のメリットを見出すにはまだ至っていない。新たな展開として多重励起子生成による高効率の光電変換の可能性は注目された。

4-2. 今後の研究に向けて

グラファイト系物質の集積化デバイス適用が進む中、本チームの貢献ポイントを明確にするとともに、グラフェン利用デバイス構造の探索・提案を強化したい。一方、CNT の多重励起子生成やグラフェンナノリボンエッジのスピントラッキングについては、現象解明にとどまっているが、デバイス研究者との交流を通してデバイス応用の探索を進めたい。

4-3. 総合的評価

グラファイト系物質の基礎物性解明などの学術的成果は国際的に高度なジャーナルに論文化され、評価できる。グラフェンの特性を現実的構造を見据えて知見としてまとめることは有意義である。一方、CREST の目標である「集積化デバイスへの適用」を超えて、多面的なデバイス応用探索を強化してグラファイト系材料の将来性開拓に貢献すべく、改めて進む方向を擦り合わせたい。